

100 и 200 нм. Из формы петель можно сделать вывод о наличии у образцов одноосной магнитной анизотропии, с осью, совпадающей с направлением технологического поля - осью легкого намагничивания (ОЛН). Наблюдение доменной структуры и форма петель гистерезиса указывают на то, что вдоль ОЛН процесс перемагничивания для всех образцов происходит путем смещения доменных стенок. При перемагничивании перпендикулярно ОЛН для пленок 100 и 200 нм (рис. 1b,c) ведущую роль играет процесс вращения вектора намагниченности (о чем свидетельствует также почти нулевое значение M_R/M_S), в то время как для пленки 10 нм, наряду с вращением, происходит также смещение доменных стенок (рис. 1a). Поле анизотропии для пленок 100 и 200 нм составляет порядка 12 Э. Однако, с уменьшением толщины наблюдается увеличение поля анизотропии, и для пленки 10 нм его величина составляет около 25 Э. Наблюдаемое различие возможно связано с увеличением роли поверхности [3], механизм которого требует дальнейшего изучения.

1. Yoshizawa Y. et al., J. Appl. Phys., 64, 6044 (1988).
2. Hernando B., Gorria P. et al., ENN., 4, 949-966 (2004).
3. Spaldin N.A., Mag. Mat., Cambridge University Press (2011).

ОБ УЛУЧШЕНИИ МОДИФИЦИРОВАННОГО Z-МЕТОДА РАСЧЕТА КРИВЫХ ПЛАВЛЕНИЯ В МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКЕ

Правишкина Т.А.^{1*}, Караваев А.В.²

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

²⁾ ФГУП «Российский Федеральный Ядерный Центр – Всероссийский Научно-Исследовательский Институт Технической Физики им. академ. Е.И. Забабахина», г. Снежинск, Россия

*E-mail: T.A.Pravishkina@urfu.ru

ON THE IMPROVEMENT OF THE MODIFIED Z-METHOD TO CALCULATE MELTING CURVE BY MOLECULAR DYNAMICS

Pravishkina T.A.^{1*}, Karavaev A.V.²

¹⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

²⁾ Russian Federal Nuclear Center – Zababakhin Institute of Technical Physics (RFNC - VNIITF), Snezhinsk, Russia

We investigate the modification [1] of the Z-method [2,3] for melting curve calculations. The modified Z-method combines an ease of implementation of the original one with advantages the coexistence method offers, but needs an improvement. The resulting liquid-solid states it gives are not in hydrostatic equilibrium. To attain to hydrostatic equilibrium, it is necessary to equalize stress components. Then the values of thermodynamic parameters obtained correspond to the equilibrium melting curve.

Одной из основных задач современной классической молекулярной динамики является корректное и подробное описание термодинамики систем, в т.ч. количественное описание/предсказание фазовых диаграмм. Даже при использовании современных многочастичных межатомных потенциалов, определение равновесных параметров фазовых переходов первого рода, в т.ч. кривых плавления, является весьма нетривиальной задачей. Это обусловлено тем, что фазовым переходам первого рода свойственен значительный гистерезис. Точность, вычислительная простота и безотказность метода расчета кривых плавления в рамках МД выходят на первый план при моделировании плавления материалов с помощью квантовой МД или при оптимизации параметров потенциалов межатомного взаимодействия, когда температура плавления является одним из целевых параметров.

Настоящая работа посвящена исследованию возможностей и границ применимости недавно предложенной модификации [1] т.н. Z-метода [2,3] для расчета кривых плавления кристаллических материалов в рамках молекулярной динамики. В данном методе для оценки температуры плавления кристаллического материала исследуется поведение микроканонического ансамбля с различными энергиями, моделирование которого проводится в вытянутой в одном из направлений счетной ячейке в периодических граничных условиях. Такая геометрия образца позволяет получить устойчивое сосуществование жидкой и кристаллической фаз. Модифицированный Z-метод, предложенный Вангом сочетает простоту реализации с достоинствами метода сосуществования, однако, он требует некоторого дополнительного расчетного шага, т.к. получающиеся в результате моделирования в NVE-подстановке состояния с равновесием жидкости и кристалла находятся в общем случае в условиях негидростатического сжатия. Для того чтобы получить равновесие при гидростатическом сжатии мы предлагаем провести дополнительный расчет с выравниванием компонент давления при сохранении объема счетной ячейки. После этого полученные значения термодинамических параметров систем соответствуют равновесной кривой плавления. Результаты наших расчетов модифицированным Z-методом с выравниванием компонент давления хорошо согласуются с равновесными кривыми плавления, полученными методом термодинамического интегрирования для тех же потенциалов. Для выяснения вопроса насколько маленьким может быть образец, мы провели серию расчетов последовательно уменьшая размеры системы. Система с наименьшими размерами, для которой удалось достичь стабильной работы Z-метода с использованием EAM-потенциала, оказалась системой размером $3 \times 3 \times 12$ элементарных ГЦК ячеек (432 атома). Такое малое количество атомов говорит о том, что метод может быть применен и для поиска кривых плавления в рамках квантовой молекулярной динамики.

1. Wang S. et al., J. Chem. Phys. 138, 134101 (2013).
2. Belonoshko A. et al., Phys. Rev. B 73, 012201 (2006).
3. Belonoshko A. et al., Phys. Rev. Lett. 100, 135701 (2008).